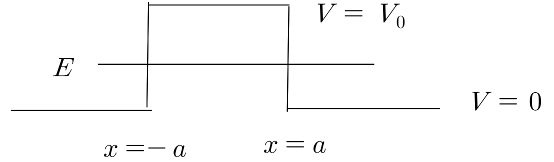
제6장　WKB 어림 (WKB Approximation)

6.1 양자 투과 (Quantum Tunneling)

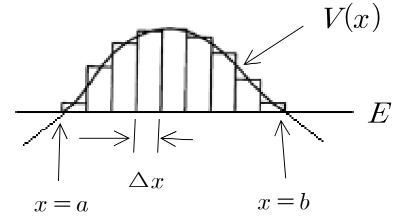
앞 장에서 우리는 네모난 장벽의 경우에 입자의 에너지가 위치에너지보다 낮을 경우에도 투과계수가 영이 아니고 다음과 같이 주어짐을 보았다.

$$T = \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2\cosh^2\kappa L + (k^2-\kappa^2)^2\sinh^2\kappa L}$$



여기서 $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$, $\kappa^2 = \dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$, $L = 2a$ 로
각각 에너지, 위치에너지 장벽과 에너지의 차이, 그리고 장벽의 폭을 나타내고 있다. 이제 위치에너지가 네모난 장벽이 아닌 일반적인 경우에 이 결과가 어떻게 적용될 수 있을 것인지 생각하여 보도록 하자.

이제 옆 그림에서와 같이 위치에너지가 입자의 에너지보다 큰 영역을 여러 개의 동일한 폭($\triangle x$)을 갖는 장벽들의 모임으로 생각하면 이러한 위치에너지 장벽을 투과하는 확률은 각각의 네모난 장벽을 투과하는 투과계수들의 곱으로 주어질 것이다.



$$T_{tot.} = \prod_i T_i \qquad \text{-----}\ (1)$$

위에 다시 쓴 네모난 장벽에서의 투과계수를 보면 장벽의 폭이 매우 좁아 $\kappa L \ll 1$ 인 경우 $\cosh\kappa L \ll \sinh\kappa L$ 이 되므로, $T \simeq \dfrac{1}{\cosh^2\kappa L} \approx e^{-2\kappa L}$ 로 주어짐을 알 수 있다. 이 결과를 일반적인 위치에너지의 경우인 (1)번 식에 적용하면 전체 투과할 확률은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$T_{tot.} \simeq \prod_i \exp(-2\kappa_i \triangle x) = \exp(-2\sum_i \kappa_i \triangle x)$$

위의 어림계산을 적용하면 우리는 다음의 결과를 얻는다.

$$T_{tot.} \simeq \exp\left(-2\int_a^b \kappa(x)\,dx\right) = \exp\left(-2\int_a^b dx\,\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)}\right) \qquad \text{-----}\ (2)$$

여기서 위치에너지와 입자의 에너지가 같아 κ값이 영이 되는 고전적인 되돌이점(turning point) 근처에서는 위의 어림(approximation) 계산을 신뢰할 수는 없지만, 위치에너지 장벽의 폭이 넓고 높은 경우에는 그러한 영향이 상대적으로 적어져서 (2)번 식은 대체적으로 맞으며 많은 경우에 우리는 (2)번 식을 사용하여 투과계수를 구할 수 있다.

위에서 언급한 되돌이점에서의 문제점까지 고려한 일반적인 경우의 보다 적절한 계산은 WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin) 어림 방식을 적용하여 하게 되는데, 이제부터 그에 대해 살펴보기로 하겠다.

6.2 WKB 어림 (WKB Approximation)

슈뢰딩거 방정식

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))\psi=0$$

에서

$$k(x)\equiv\begin{cases}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))} & \text{for} \quad E>V(x)\\ -i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)} & \text{for} \quad E<V(x)\end{cases}$$

로 정의하면 위 식은 다시 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+[k(x)]^2\psi=0$$

여기서 $\frac{\hbar^2k^2}{2m}=E-V(x)$는 위치 x에서의 고전적인 운동에너지를 표시하므로 k는 운동량 p와 다음과 같이 연관된 각 점에서의 드브로이 물질파의 파수(wave number)라고 생각할 수 있다.

$$p=\hbar k=\frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda}=\frac{h}{\lambda}$$

여기서 위치에너지 $V(x)$가 상수인 경우 우리는 그 해가 다음과 같은 해로 주어짐을 알고 있다.

$$\psi(x)=\begin{cases}e^{\pm ikx} & \text{for} \;\; E>V\\ e^{\pm\kappa x} & \text{for} \;\; E<V, \;\; \kappa=ik\end{cases}$$

그러나 위치에너지 $V(x)$가 상수가 아닌 일반적인 함수인 경우 그 해를 구하기는 매우 어렵다. 여기서 만약 위치에너지가 x에 따라 매우 천천히 변한다면, 우리는 위의 평면파 해를 약간 변형시킨 다음과 같은 파동함수를 생각해 볼 수 있을 것이다.

$$\psi(x)=e^{is(x)}$$

여기서 $s(x)$가 1차 함수인 경우는 위에 기술한 해가 됨을 알 수 있다. 이제 이 새로운 파동함수를 슈뢰딩거 방정식에 대입하면 함수 $s(x)$는 다음의 미분방정식을 만족하게 된다.

$$i\frac{d^2s}{dx^2}-\left(\frac{ds}{dx}\right)^2+[k(x)]^2=0 \qquad \text{-----} \; (1)$$

위 식을 $\left(\frac{ds}{dx}\right)^2=i\frac{d^2s}{dx^2}+[k(x)]^2$ 로 다시 쓰면,

$$\frac{ds}{dx}=\pm\sqrt{i\frac{d^2s}{dx^2}+[k(x)]^2}$$

이 되어 다음의 적분식을 얻는다.

$$s(x)=\pm\int^x\sqrt{i\frac{d^2s}{dx^2}+[k(x)]^2}\,dx+C$$

여기서

$$\left|\frac{d^2s}{dx^2}\right| \ll |k^2(x)| \qquad ----- \quad (2)$$

이 성립한다면, $\dfrac{ds}{dx} \simeq \pm k(x)$로 쓸 수 있으므로

위 식은 $s(x) \simeq \pm\displaystyle\int^x \sqrt{i\frac{dk}{dx} + [\,k(x)]^2}\ dx\ +\ C$ 이 되어 다시 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$s(x) \simeq \int^x \left\{\pm\, k(x) + \frac{i}{2}\frac{dk/dx}{k(x)}\right\} dx\ +\ C$$

$$= \pm\int^x k(x)\,dx + \frac{i}{2}\log\,[k(x)] +\ C$$

그러므로 우리는 파동함수를 다음과 같이 쓸 수 있다.

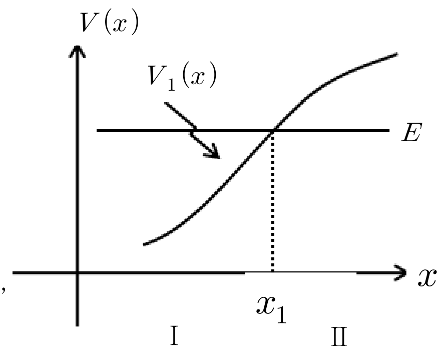
$$\psi(x) = e^{is(x)} \simeq \frac{A}{\sqrt{k(x)}}\exp\left[\pm i\int^x k(x)\,dx\right] \qquad ------ \ (3)$$

여기서 A는 상수이다.
우리는 이상의 어림 계산을 WKB 어림이라고 한다.
WKB 어림에서의 핵심은 (2)번 가정인데, 이제 이에 대하여 생각하여 보자.
(2)번 가정은 다시

$$\left|\frac{dk}{dx}\right| \ll |k(x)|^2$$

가 되어 $p = \hbar k = \dfrac{h}{\lambda}$ 의 관계를 적용하면, $\dfrac{\lambda(x)}{2\pi}\dfrac{dp}{dx} \ll p(x)$ 이 되므로 이는 드브로이 물질파 한 파장 정도의 범위에서는 운동량의 변화가 운동량에 견주어 아주 작음을 의미한다. 이는 물질파동의 파장 범주에서는 위치에너지의 변화가 아주 작음을 의미한다.
때문에 WKB 어림은 $k(x)$가 급격하게 변하거나, 영이 될 경우 적용할 수 없다. $E = V(x)$가 되는 고전적인 되돌이점(turning point)의 이러한 경우에 해당한다. 그러므로 되돌이점 근처에서는 슈뢰딩거 방정식을 만족하는 파동함수를 독립적으로 구하여 WKB 가정이 만족되는 되돌이점을 벗어난 영역에서의 WKB 어림에 의한 파동함수들과 연결시켜 주어야 한다. 그러므로 이제는 되돌이점 근처에서 슈뢰딩거 방정식을 만족하는 파동함수를 생각하여 보도록 하자.

6.3 연결 공식과 에어리 함수 (Connection formulas and Airy functions)



이제 옆 그림에서처럼 되돌이점 $x = x_1$ 근처에서 위치에너지 $V(x)$가 증가하는 경우에 우리는 다음과 같이 급수 전개하여 쓸 수 있다.

$$V(x) = V(x_1) + \frac{dV}{dx}\Big|_{x=x_1}(x-x_1) + O((x-x_1)^2)$$

여기서 $V(x_1) = E$ 이므로, $\dfrac{dV}{dx}\Big|_{x=x_1} \equiv c_1 > 0$ 라고 하면,

$V(x) \simeq V_1(x) = c_1(x-x_1) + E$ 가 된다. 계수 c_1은 위치에너지 함수 $V(x)$의 되돌이점 x_1에서의 접선의 기울기이다. 이제 되돌이점 x_1 근처에서 슈뢰딩거 방정식은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{d^2\psi_t}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} c_1(x-x_1)\psi_t(x) = 0$$

여기서 $y = (\frac{2m}{\hbar^2}c_1)^{\frac{1}{3}}(x-x_1)$ 변수 치환을 하면, 위 식은 다음과 같이 된다.

$$\frac{d^2\psi_t}{dy^2} - y\,\psi_t = 0$$

우리는 위 방정식을 에어리의 방정식(Airy's equation)이라고 하고 이를 만족하는 해를 에어리 함수(Airy functions)라고 한다. 에어리 함수는 $Ai(y)$와 $Bi(y)$의 두 종류가 있으며 우리가 필요로 하는 $|y| \gg 0$ 인 영역에서 해의 점근적인 형태(asymptotic form)는 다음과 같이 주어진다.

$$Ai(y) \sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}\,y^{\frac{1}{4}}}\exp[-\frac{2}{3}y^{\frac{3}{2}}]\ , \quad Bi(y) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}\,y^{\frac{1}{4}}}\exp[\frac{2}{3}y^{\frac{3}{2}}] \quad \text{for} \quad y \gg 0$$

$$Ai(y) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-y)^{\frac{1}{4}}}\sin[\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}]\ , \ Bi(y) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-y)^{\frac{1}{4}}}\cos[\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}] \quad \text{for} \quad y \ll 0$$

한편, 되돌이점 x_1에서 멀리 떨어진 영역 I ($x < x_1$)이나 영역 II ($x > x_1$)에서는 WKB 어림에 의해 구한 파동함수를 해로 쓸 수 있으므로 (3)번 식으로부터 그 해를 다음과 같이 쓸 수 있다.

영역 I 에서는 $E > V(x)$ 이므로 WKB 어림에 의한 해들인 $\sim \frac{1}{\sqrt{k(x)}} e^{\pm i\int_x^{x_1} k(x)\,dx}$ 의 선형 결합으로 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi_I(x) = \frac{F}{\sqrt{k(x)}}\sin\left[\int_x^{x_1} k(x)\,dx + \delta\right]\ , \quad k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))}$$

영역 II 에서는 $E < V(x)$ 이므로 WKB 어림에 의한 해들 중에서 $x \to \infty$ 일 때 파동함수가 발산하지 않으려면 다음의 해를 가져야 한다.

$$\psi_{II}(x) = \frac{G}{\sqrt{\kappa(x)}}\exp\left[-\int_{x_1}^{x} \kappa(x)\,dx\right]\ , \quad \kappa(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)}$$

위에서 F, G는 상수이고, 영역 I 에서 $\int_x^{x_1} k\,dx$ 는 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$\int_x^{x_1} k\,dx = \int_x^{x_1}\left[-\frac{2m}{\hbar^2}c_1(x-x_1)\right]^{\frac{1}{2}} dx = \int_y^{0}(-y)^{\frac{1}{2}}\,dy = -\int_{t_-=-y}^{t_+=0} t^{\frac{1}{2}}\,dt = \frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}$$

그리고 영역 II에서 $\int_{x_1}^{x} \kappa\,dx$ 는 다음과 같이 된다.

$$\int_{x_1}^{x} \kappa\,dx = \int_{x_1}^{x}[\frac{2m}{\hbar^2}c_1(x-x_1)]^{\frac{1}{2}}\,dx = \int_0^{y} y^{\frac{1}{2}}\,dy = \frac{2}{3}y^{\frac{3}{2}}$$

한편 되돌이점 근처에서의 파동함수는 에어리 함수들의 선형결합으로 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi_t(y) = \alpha Ai(y) + \beta Bi(y), \qquad \alpha, \beta \text{ 는 상수}$$

여기서 영역 I에서는 $y<0$ 이 되고, 영역 II에서 $y>0$ 이 됨을 기억하자.

이제 영역 II의 경우, 파동함수는 감쇠하여야 하는데, 에어리 함수 $Bi(y)$ 의 점근 표현은 발산하므로, 선형 결합의 계수중 β 는 영이 되어야 한다.

즉, 되돌이점 근처에서의 파동함수는 $\psi_t(y) = \alpha Ai(y)$ 로 주어진다. 이제 이 파동함수가 영역 I ($y \ll 0$)에서는 WKB 파동함수 ψ_I 와 같아져야 하므로 계수 $F \sim \alpha$, 위상 $\delta = \frac{\pi}{4}$ 가 되어야 하고, 영역 II ($y \gg 0$)에서는 WKB 파동함수 ψ_{II} 와 같아져야 하므로, 계수 $G \sim \frac{\alpha}{2}$ 가 되어야 하므로 계수 F 와 G 는 $F = 2G$ 의 관계에 있다. 즉, WKB 파동함수는 이 경우 다음과 같이 주어진다.

$$\psi(x) = \begin{cases} \dfrac{2G}{\sqrt{k(x)}} \sin\left[\displaystyle\int_x^{x_1} k(x)\,dx + \frac{\pi}{4}\right], & x < x_1 \\ \dfrac{G}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left[-\displaystyle\int_{x_1}^{x} \kappa(x)\,dx\right], & x > x_1 \end{cases}$$

이제 되돌이점 근처에서 위치에너지가 감소하는 경우의 해도 우리는 동일한 방식으로 구할 수 있다. 되돌이점이 x_2 라고 하면, 이 경우 위치에너지는 다음과 같이 급수전개 하면

$$V(x) \simeq V_2(x) = -c_2(x - x_2) + E, \quad c_2 > 0$$

슈뢰딩거 방정식

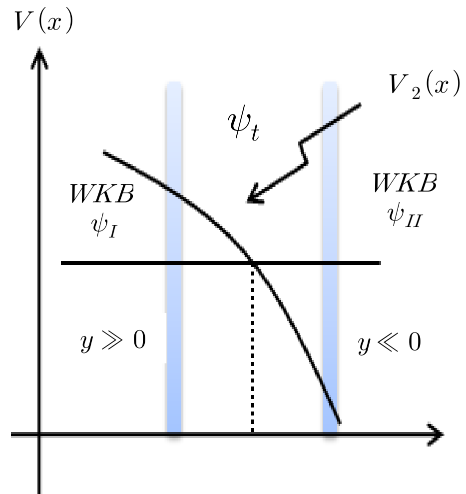
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0$$

은 되돌이점 근처인 변환영역에서 파동함수를 ψ_t 로 표시하면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{d^2\psi_t}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} c_2 (x - x_2)\psi_t = 0$$

여기서 $y = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}c_2\right)^{\frac{1}{3}}(x - x_2)$ 로 정의하면 위 식은 다시 다음과 같이 되어

$$\frac{d^2\psi_t}{dy^2} - y\psi_t = 0$$



우리는 앞에서와 동일하게 에어리의 방정식을 얻는다.

이제 점근 영역 I 과 II에서 WKB 파동함수와 되돌이점 근처에서의 파동함수로서 에어리 함수의 선형결합을 사용하면 우리는 다음과 같이 쓸 수 있다.

영역 I 에서 WKB 파동함수가 발산하지 않아야 하므로 우리는 다음과 같이 그 해를 쓸 수 있다.

$$\psi_I(x) = \frac{F'}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left[-\int_x^{x_2} \kappa(x)\,dx\right], \quad \kappa(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)}$$

영역 II 에서는 $\sim \frac{1}{\sqrt{k(x)}} e^{\pm i \int_{x_2}^{x} k(x)\, dx}$ 의 선형 결합으로 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi_{II}(x) = \frac{G'}{\sqrt{k(x)}} \sin\left[\int_{x_2}^{x} k(x)\, dx + \gamma\right], \quad k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))}$$

위에서 F', G' 는 상수이고, 영역 I 에서 $\int_{x}^{x_2} \kappa\, dx$ 는 다음과 같이 된다.

$$\int_{x}^{x_2} \kappa\, dx = \int_{x}^{x_2} [-\frac{2m}{\hbar^2} c_2 (x - x_2)]^{\frac{1}{2}}\, dx = \int_{y}^{0} y^{\frac{1}{2}}\, dy = \frac{2}{3} y^{\frac{3}{2}}$$

영역 II 에서 $\int_{x_2}^{x} k\, dx$ 는 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$\int_{x_2}^{x} k\, dx = \int_{x_2}^{x} \left[\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} c_2 (x - x_2)\right]^{\frac{1}{2}} dx = \int_{y}^{0} (-y)^{\frac{1}{2}}\, dy = -\int_{t_- = -y}^{t_+ = 0} t^{\frac{1}{2}}\, dt = \frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}}$$

그리고 $\kappa(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)} = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} c_2 (x - x_2)} \sim y^{\frac{1}{2}}$,

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} c_2 (x - x_2)} \sim (-y)^{\frac{1}{2}}$$ 이므로

앞에서 쓴 WKB 파동함수는 영역 I 과 영역 II에서 각각 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi_I \sim \frac{F'}{y^{\frac{1}{4}}} \exp\left[-\frac{2}{3} y^{\frac{3}{2}}\right], \quad y \gg 0$$

$$\psi_{II} \sim \frac{G'}{(-y)^{\frac{1}{4}}} \sin\left[\frac{2}{3}(-y)^{\frac{3}{2}} + \gamma\right], \quad y \ll 0$$

한편 앞의 경우와 마찬가지로 되돌이점 근처인 변환영역에서 파동함수의 일반적인 표현은 에어리 함수들의 1차 결합으로 주어지므로 다음과 같다.

$$\psi_t(y) = \alpha' Ai(y) + \beta' Bi(y), \qquad \alpha', \beta' \text{ 는 상수}$$

이러한 변환영역에서의 파동함수는 되돌이점 근처에서 멀리 떨어진 점근영역에서는 WKB 파동함수와 같아져야 한다. 그러므로 영역 I의 경우($y \gg 0$) WKB 파동함수 ψ_I 은 에어리 함수 중에서 $Ai(y)$ 와 같아짐을 알 수 있다. 이는 $\beta' = 0$ 이 되고, F' 은 $\frac{\alpha'}{2\sqrt{\pi}}$ 에 대응함을 보여준다. 따라서 영역 II의 경우($y \ll 0$) WKB 파동함수 ψ_{II} 는 에어리 함수 $Ai(y)$ 와 같아져야 하므로, G' 은 $\frac{\alpha'}{\sqrt{\pi}}$ 에 대응하고, $\gamma = \frac{\pi}{4}$ 가 되어야 함을 알 수 있다.

요약하면, 이 경우는 WKB 파동함수가 다음과 같이 주어진다.

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{F'}{\sqrt{\kappa(x)}} \exp\left[-\int_{x}^{x_2} \kappa(x)\, dx\right], & x < x_2 \\ \frac{2F'}{\sqrt{k(x)}} \sin\left[\int_{x_2}^{x} k(x)\, dx + \frac{\pi}{4}\right], & x > x_2 \end{cases}$$
